



PANM 17

PROGRAMY A ALGORITMY
NUMERICKÉ MATEMATIKY 17

8.–13. června 2014, Dolní Maxov

<http://www.math.cas.cz/panm>

panm@math.cas.cz

ABSTRAKTY

On the stability of the space-time discontinuous Galerkin method for the numerical solution of nonstationary nonlinear convection-diffusion problems

M. Balázsová

The subject of this paper is the analysis of the space-time discontinuous Galerkin method for the solution of nonstationary, nonlinear, convection-diffusion problems. In the formulation of the numerical scheme, the nonsymmetric, symmetric and incomplete versions of the discretization of diffusion terms and interior and boundary penalty are used. Then error estimates are briefly characterized. The main attention is paid to the investigation of unconditional stability of the method. An important tool is the concept of the discrete characteristic function. Theoretical results are accompanied by numerical experiments.

Konstrukce obálky dvojparametrického systému křivek v technické praxi

S. Bartoň

V článku je nejprve provedena matematická definice problému. V druhém kroku je odvozena obecná diferenciální rovnice, podmiňující existenci řešení. V této části jsou presentovány algoritmy, založené na numerickém řešení této rovnice, popisující praktické technické a konstrukční problémy.

FEM solver for incompressible flow problems

P. Bauer

We develop a FEM solver for flow problems based on incompressible Navier-Stokes equations. The discretization of the convective term is semi-implicit and the resulting linear systems are solved using multigrid techniques with different types of smoothers. The implementation is parallelized via OpenMP. The results of numerical simulations are presented.

Možnosti využití waveletové analýzy při vyhodnocování variability srdeční frekvence

V. Bittner

Srdeční frekvence představuje biosignál, jehož spektrální analýza umožňuje zachytit a kvantitativně vyjádřit regulační vlivy kardiálního autonomního nervového systému. Jeho vyhodnocení má v klinické praxi humánní i veterinární medicíny značný význam. Namátkou lze zmínit monitorování normativního stavu novorozenců, screeningové využití u kardiomyopatií a srdečních autonomních neuropatií různé etiologie, či k predikci rizika náhlé srdeční smrti. Příspěvek se zabývá možnostmi využití waveletů v této problematice. Ty představují zajímavou alternativu k běžně využívané FFT.

An a posteriori error estimate for the Stokes-Brinkman problem in a polygonal domain

P. Burda

We derive a residual based a posteriori error estimate for the Stokes Brinkman problem on a two-dimensional polygonal domain. We use Hood-Taylor triangular elements. The link to the possible information on the regularity of the problem is discussed.

Different approaches to interface weights in the BDDC method

M. Čertíková, J. Šístek, P. Burda

In this paper, we discuss the choice of weights in averaging of local (subdomain) solutions on the interface for the BDDC method (Balanced Domain Decomposition by Constraints). We try to find relations among different choices of the interface weights and numerically compare them on problems of stationary heat conduction and linear elasticity in 3D. Problems with either jumps in coefficients of material properties or without the jumps are considered.

Perspectives of discontinuous Galerkin method for the numerical solution of computational fluid dynamics problems

V. Dolejší

We present the discontinuous Galerkin method (DGM) as an efficient tool for the numerical solution of systems of computational fluid dynamics problems. We discuss several aspects of DGM in comparison with standard techniques represented by finite element and finite volume methods from the point of view of accuracy, efficiency and robustness. We also discuss the implementation aspects as the efficient solution of arising (non)linear algebraic systems and the parallelization issues.

Využití isogeometrické analýzy při modelování proudění

J. Egermaier

Příspěvek je věnován numerické simulaci vazkého nestlačitelného proudění. Numerický model je založen na isogeometrické analýze a Navierových-Stokesových rovnicích. Jedná se o část projektu věnovanému tvarové optimalizaci lopatek vodních turbín. V praxi je běžné vytvářet design v CAD systémech a také diskretizační sítě potřebné pro konečně prvkovou analýzu jsou vytvářeny z CAD dat. Každá změna tvaru vyžaduje vytvoření nové sítě, což je časově náročné. Výhodou isogeometrického přístupu je geometrická přesnost bez ohledu na diskretizaci. Není třeba vytvářet novou síť, neboť ta je získána přímo z CAD reprezentace pomocí tzv. "NURBS prvků". Navíc zjemňování sítě či zvyšování stupně bazových prvků je velice jednoduché, efektivní a robustní.

Numerical modelling of a bridge subjected to simultaneous effect of a moving load and a vertical seismic ground excitation

C. Fischer

A beam subjected to a row of moving forces and simultaneous vertical motions of its supports is described using a simplified theoretical model. Several levels of simplification of the input data are supposed. Numerical results are compared to approximative closed form solutions.

Paralelní výpočet nestlačitelného stacionárního proudění pomocí metody BDDC

M. Hanek

V práci se zabýváme paralelním numerickým řešením Navierových-Stokesových rovnic pro nestlačitelné stacionární proudění. To je počítáno za použití předpokládaně BDDC. Presentujeme výpočty pro úlohu kavity a schodu v kanálu a dále výsledky pro proudění v hydrostatickém ložisku.

Numerické metody pro řešení advekčně-difúzní rovnice

H. Horníková

Příspěvek je věnován některým metodám pro řešení stacionární difúzní a advekčně-difúzní rovnice s budoucím cílem zobecnění pro řešení Navierových-Stokesových rovnic. Zvolený přístup je založen na převodu původní rovnice na soustavu dvou parciálních diferenciálních rovnic hyperbolického typu. To umožní méně restriktivní volbu časového kroku v případě použití explicitních metod pro řešení evolučních úloh (vnímaných jako iterační metody pro získání aproximace ustáleného stavu), příp. vede k méně problematickému číslu podmíněnosti matice příslušné soustavy. Lze taktéž užít jednotný diskretizační přístup k advekci a difúzi. Bylo provedeno několik numerických experimentů pro ověření vlastností metody a jejího rozšíření pro řešení rovnic s proměnným difúzním koeficientem. Pro urychlení konvergence k ustálenému stavu aplikujeme vhodnou metodu typu multigríd a navrhuje též možnost využití metod jako je GMRES s předpodmíněním.

Intracranial aneurysm: a challenge for mathematical modeling and computations

J. Hron

On the problem of intracranial aneurysm we discuss several areas of mathematical models which might be necessary to consider in the complex problem like this. First we discuss the the appropriate model for the flow of the blood in vessel size typical for brain. The possibility of hierarchy of models from newtonian, through power-law fluid till the mixture based models. This is then connected to the question of correct boundary conditions on the vessel walls, which can have significant influence on the usual measures like the wall shear stress. Next, we can report on recent CFD challenge project, where several groups used different softwares to compute a flow in given aneurysm geometry obtaining quite wide range of results mostly due to the choice of boundary conditions. Finally, there is the question how the interaction with the elastic wall can change the flow and how this can be included in the numerical simulation.

Identifikace parametrů v počátečních úlohách pro obyčejné diferenciální rovnice

J. Chleboun, K. Mikeš

Jsou uvažovány počáteční úlohy pro obyčejné diferenciální rovnice, například nelineární model hydratace cementové pasty. Modelová úloha závisí na několika parametrech a na počáteční podmínce. Tato vstupní data mají být určena na základě měření modelovaného jevu (např. úrovně hydratace) v konečné posloupnosti časových bodů. Identifikace je provedena pomocí minimalizace účelové funkce, která je definována jako vážený součet kvadrátů rozdílů mezi hodnotou měření a odezvou modelu v daných časových bodech. K nalezení globálního minima je použit SQP algoritmus opakovaně spouštěný s různými startovacími body. Gradient účelové funkce je počítán buď čistě numericky, a to numerickým derivováním účelové funkce, nebo numericko-analyticky prostřednictvím numerického řešení analyticky odvozených pomocných počátečních úloh. Algoritmus řešení identifikační úlohy je implementován v prostředí Matlab s podstatným využitím rozšiřujících nástrojů Optimization Toolbox a Symbolic Math Toolbox.

Výpočtové algoritmy pro navrhování nízkoenergetických staveb

P. Jarošová

Evropská legislativa (zejména směrnice č. 2010/31/EU) a navazující české předpisy směřují k požadavkům energeticky úsporných staveb, jež nelze rozumně navrhovat klasickým prokazováním tepelného odporu řešením linearizovaných stacionárních rovnic vedení tepla. Podrobná termodynamická analýza, zohledňující solární zisky v přibližných ročních a denních klimatických cyklech, proudění vzduchu v místnostech apod. však vede k formulaci rozsáhlých soustav evolučních rovnic částečně stochastického charakteru, jejichž numerické řešení nelze po projektantech požadovat. Příspěvek poukazuje na možnost kompromisního přístupu ke stavbě jako tepelnému systému, jehož jednotlivé prvky a subsystemy jsou navzájem vázány (předem neznámými) hraničními tepelnými toky. Vyvíjený software na FAST VUT v Brně je konfrontován s dostupnými údaji o provozování realizovaných staveb.

Numerical modelling of viscous and viscoelastic fluids flow through the branching channel

R. Keslerová, K. Kozel

This work deals with the numerical solution of viscous and viscoelastic fluids flow. The governing system of equations is the generalized system of Navier-Stokes equations. The finite volume method combined with the artificial compressibility method is used for the spatial discretization. For the time discretization the explicit multistage Runge-Kutta scheme is used. Numerical results for three dimensional branching channel are presented.

Algebraický multigrid na GPU

V. Klement

Poster se zabývá moderní metodou pro řešení soustav rovnic - algebraickým multigridem. Vysvětluje základy této metody a její implementaci, porovnává ji s metodou geometrického multigridu a demonstruje způsob, jak je možné ji efektivně převést na grafické karty. V závěru obsahuje výsledky, kterých bylo dosaženo na testovací úloze vedení tepla.

Scale separation in fast hierarchical solvers for discontinuous Galerkin methods

L. Korous

We present a method for solution of linear systems resulting from discontinuous Galerkin (DG) approximations. The two-level algorithm is based on a hierarchical scale separation (HSS) such that the linear system is solved globally only for the cell mean values which represent the coarse scales of the DG solution. The system matrix of this coarse scale problem is exactly the same as in the cell-centered finite volume method. The higher order components of the solution (fine scales) are computed as corrections by solving small local problems. This technique is particularly efficient for DG schemes that employ hierarchical bases and leads to an unconditionally stable method for stationary and time-dependent hyperbolic and parabolic problems. Unlike p-multigrid schemes, only two levels are used for DG approximations of any order. The proposed method is conceptually simple and easy to implement. It compared favorably to p-multigrid in our numerical experiments. Numerical tests confirm the accuracy and robustness of the proposed algorithm.

Acceleration of direct and iterative solvers used in domain decomposition based algorithms by novel techniques and novel many-cores accelerators

T. Kozubek

The contribution describes acceleration of direct and iterative solvers used in FETI (Finite Element Tearing and Interconnecting) domain decomposition based algorithms applied to the solution of extremely large and complex problems arising in computational mechanics.

FETI type domain decomposition methods are powerful tool for constructing numerically and parallel scalable solvers. A great deal of research effort has been devoted worldwide to studying this topic. The reason is that FETI methods can dramatically increase potential and reliability of significant applications of FEM (Finite Element Method). The new FETI classes of methods and their applications represent a novel solution to many challenging problems with great impact to computational sciences.

First, we briefly describe ideas of the hybrid FETI domain decomposition method enabling massive parallelization until tens of thousands of cores. Then we say a few words about the Krylov subspace methods and preconditioners used in FETI solvers and how to accelerate them using communication avoiding and hiding techniques. The coarse problem solution is accelerated using MAGMA LU factorization based on many-cores accelerators GPU Nvidia Tesla K20m and Intel Xeon Phi 5110P. Finally, the performance of the resulting algorithms are demonstrated on mechanical engineering benchmarks and compared with standard FETI algorithms.

Tangential fields in the mathematical model of localized surface plasmons

J. Krček, J. Vlček

The problem of optical diffraction on periodical interface is solved using boundary integral equations. The numerical algorithm for recently developed mathematical model based on vector tangential fields is derived and implemented as the Matlab code. Obtained results are applied to plasmonic response analysis.

Sdružený přenos tepla a vlhkosti v pórovitých materiálech: modely, implementace, homogenizace a paralelizace

J. Kruis, J. Maděra, T. Krejčí, J. Sýkora, M. Šejnoha

Přednáška bude věnována modelování sdruženého přenosu tepla a vlhkosti v pórovitých materiálech. Hlavní pozornost bude věnována Künzelovu modelu, v němž vystupují jako neznámé veličiny teplota a relativní vlhkost. Bude popsána diskretizace úloh přenosu tepla a vlhkosti metodou konečných prvků. Dále bude studován vliv jednotlivých materiálových parametrů na soustavy algebraických rovnic. Künzelův model byl úspěšně použit i ve víceúrovňové analýze reálných inženýrských úloh, ve kterých byla použita homogenizace prvního řádu. S ohledem na velkou výpočetní náročnost víceúrovňové analýzy byla využita paralelizace a úlohy byly řešeny na paralelním počítači.

Modeling of coupled heat transport and water flow in porous media and fractured rock masses

L. Krupička

This contribution deals with modeling of coupled heat transport and water flow in unsaturated porous media accounting for conditions of freezing and thawing. The model is based on basic conservation equations, e.g. mass conservation equation and energy conservation equation. The complete model consists of two nonlinear partial differential equations with unknown total pressure head and temperature and prescribed boundary and initial conditions. Numerical procedure is based on a semi-implicit time discretization, which leads to a system of coupled nonlinear stationary equations. The next part of this contribution deals with the existence of a weak solution to the discretized problem. We also present some illustrative numerical example compared with the practical experiment. The spacial discretization is carried out by the FE-method and it is implemented in Matlab.

On angle conditions in the finite element method

M. Krížek

Angle conditions play an important role in the analysis of the finite element method. They enable us to derive the optimal interpolation order and prove convergence of this method, to derive various a posteriori error estimates, to perform regular mesh refinements, etc. In 1968, Milos Zlamal introduced the minimum angle condition for triangular elements. From that time onward many other useful geometric angle conditions on the shape of elements appeared. We shall give a survey of various generalizations of the minimum and also maximum angle condition in the finite element method and present some of their applications.

Možnosti efektivní implementace hp -adaptivity

P. Kůs, L. Korous, P. Karban

Hlavní výhodou hp varianty konečných prvků je rychlá konvergence chyby v závislosti na počtu stupňů volnosti. Nevýhodou, která je obzvláště citelná pro praktické výpočty, je relativní náročnost každého z jednotlivých adaptivních kroků. Výsledná celková doba výpočtu tedy může být příliš vysoká. V příspěvku bude prezentováno několik možností, jak dobu výpočtu jednotlivých kroků snížit za využití informací získaných v předchozím kroku. Použita může být nejen část v předchozím kroku sestavené matice, ale i její LU rozklad. Ten může být využit buď k urychlení nového LU rozkladu, ke konstrukci Schurova doplňku nebo ke konstrukci předpodmínovače pro vhodnou iterační metodu. V příspěvku bude srovnána efektivita několika různých přístupů.

Downsampling algorithms for large sparse matrices

D. Langr

Mapping of sparse matrices to processors of a parallel system may have a significant impact on the development of sparse-matrix algorithms and, in effect, to their efficiency. We present and empirically compare two downsampling algorithms for sparse matrices. The first algorithm is independent of particular matrix-processors mapping, while the second one is adapted for cases where matrices are partitioned among processors according to contiguous chunks of rows/columns. We show that the price for the versatility of the first algorithm is the collective communication performed by all processors. The second algorithm uses more efficient communication strategy, which stems from the knowledge of mapping of matrices to processors, and effectively outperforms the first algorithm in terms of running time.

Vlastnosti nelineárních metod sdružených gradientů a jejich numerické porovnání

L. Lukšan, J. Vlček

Příspěvek je věnován spádovým nelineárním metodám sdružených gradientů. Jsou studovány otázky globální konvergence a vyšetřován vliv výběru délky kroku a podmíněného přerušování iteračního procesu na účinnost jednotlivých metod. Efektivní metody jsou porovnávány pomocí několika souborů testovacích problémů.

Simulation of multiple particle movement in electromagnetic field

F. Mach

We present a multi-particle tracing algorithm. This algorithm will be used in design of devices where particle movement is determined by both field-particle and particle-particle interaction. An example is a device for high-quality separation of triboelectrically charged plastic particles. The main principle of this separator is based on the Coulomb force acting on freely falling charged dielectric particles. Distribution of electric field in the system is solved numerically by a fully adaptive higher-order finite element method and the movement of particles in the device is determined by a Runge-Kutta-Fehlberg algorithm.

Numerical simulation of crack propagation based on linear elastic fracture mechanics

K. Mikeš

In linear fracture mechanics, it is common to use the local Irwin criterion or the equivalent global Griffith criterion for decision whether the crack is propagating or not. In both cases, a quantity called the stress intensity factor can be used. In this paper, four methods are compared to calculate the stress intensity factor numerically; namely by using the stress values, the shape of a crack, nodal reactions and the global energetic method. The most accurate global energetic method is used to simulate the crack propagation in opening mode. In mixed mode, the maximum energy release rate criterion and the maximum circumferential stress criterion are used to predict the angle of propagation and crack path. The both criterions are implemented in FEM program and results are verified by a comparison with examples used by other authors.

Užití grafické karty a architektury nVidia CUDA při optimalizaci intenzity tepelného záření

J. Mlýnek, R. Srb, R. Knobloch

Článek je zaměřen na problematiku urychlení počítačového zpracování optimalizace intenzity tepelného záření na povrchu kovové formy, přitom ohřev formy je realizován infrazářiči. K optimalizaci je použitý genetický algoritmus. Jeho součástí je opakovaný a z hlediska počtu operací náročný výpočet intenzity tepelného záření na povrchu formy. Provedení této části algoritmu lze výrazně urychlit použitím nástrojů paralelního programování a grafické karty s architekturou nVidia CUDA (Compute Unified Device Architecture). V příspěvku jsou porovnány časové náročnosti provedených výpočtů pro tři případy: při použití standardního programu v prostředí Matlab, při paralelním výpočtu s využitím více jader CPU a při výpočtu probíhajícím na grafické kartě.

Wavelety a prognózování v časových řadách

V. Mošová

Wavelety jsou moderní matematický nástroj používaný při zpracování signálů, v numerické matematice i ve statistice. Waveletová transformace umožňuje zkoumat zadaná data ve frekvenční i časové oblasti, oddělit aproximace od detailů, efektivně počítat waveletové koeficienty pomocí rychlé Fourierovy transformace. Vzhledem k těmto vlastnostem je waveletová transformace vhodná k analýze a prognózování v časových řadách. Příspěvek bude zaměřen na tuto problematiku. K prognózování časových řad budou využity wavelety kombinované s Box-Jenkinsovými modely. Na závěr budou tyto metody demonstrovány na příkladech z praxe.

Comparison of three methods for a parameter estimation problem based on FRAP data

Š. Papáček, C. Matonoha

FRAP (Fluorescence Recovery After Photobleaching) is a routine measurement technique for determination of the mobility of autofluorescent molecules within the living cells. While the experimental setup and protocol are usually fixed, the method used for the model parameter estimation, i.e. the data processing step, is not well established up today. In this contribution, we first formulate the inverse problem of parameter estimation based on experimental (noisy) data. Then we use our previous work to announce how the data space selection and the data preprocessing influence the confidence interval of the estimated parameter, being the diffusion coefficient D . Finally, we compare three different methods for computation of a least-squares estimate D , both theoretically (based on the sensitivity analysis) and practically (on a numerical example).

A fast implementation of the minimum degree ordering

P. Pařík

The minimum degree ordering is one of the most widely used ordering algorithms. Its purpose is to reduce the fill-in introduced during the factorization of a sparse matrix. There are several modifications that improve the speed of the algorithm, especially the approximate minimum degree algorithm. Unfortunately, the ordering problem is NP-complete, therefore, the minimum degree ordering is a heuristic algorithm. Our approach focuses mainly on the optimization of the minimum degree algorithm at the implementation level, in particular, on set operations done on the graph structure representing the sparse matrix. We present a comparison of several minimum degree algorithms and assess the performance specifically on large sparse matrices.

2D simulation of flow behind a heated cylinder using spectral element approach with variable coefficients

J. Pech

Results from 2D computations of flow behind a heated cylinder using Spectral Element Method is presented. Vortex shedding in regimes of Reynolds number from interval $[50,160]$ is simulated, using polynomial approximation of very high order and minimizing the number of subdomains. Temperature dependent material coefficients of water and air are used in the set of governing equations, since the viscosity dependence on temperature has opposite behavior for these two fluids. Variations in drag/lift coefficients are observed and extracted Strouhal-Reynolds-Prandtl number relation is compared with data from experiment.

Matematické podklady a příprava dat pro optimalizaci svozové trasy komunálního odpadu

M. Petřík

Předložený poster nejprve řeší převod zeměpisných souřadnic GPS-WGS84 do pravoúhlých kartézských souřadnic a to jak pro místa vzniku odpadu tak pro geometrii topologického problému. V druhém kroku je proveden výpočet matice sousednosti a provede se základní redukce složitosti kostry grafu a to s ohledem na geometrii dané obce a míst vzniku odpadu. Ve třetím kroku se do kostry grafu vloží podcesty, které umožní generovat efektivnější trasování svozu odpadu.

The solution of quadratic programming problem with separable conical constraints in granular dynamics

L. Pospíšil, Z. Dostál

The numerical solution of granular dynamics problems with Coulomb friction leads to the problem of minimizing a convex quadratic function with semidefinite Hessian subject to a separable conical constraints. In this paper, we shortly review the mathematical modelling aspects of granular dynamics and we discuss the solvability of the inner optimizing problem using the recently published theory. For the solution of the problem, we compare several algorithms, such as Accelerated Projected Gradient method or Spectral Projected Gradient method.

Experimental comparison of second-order traffic flow models on traffic data

J. Příkryl, I. Horňák

Despite their deficiencies, second-order traffic flow models are still commonly used to derive discrete-time models that help traffic engineers to model and predict traffic flow behaviour on highways. We will briefly overview the development of traffic flow theory based on continuous flow-density models of Lighthill-Whitham-Richards type, leading to modern continuous models introduced by Daganzo, Aw and Rascle, and their numerical solutions. We will then concentrate on discretisation of these continuous models by Daganzo, that helps to keep the problem computationally tractable even for large traffic networks, which has been widely adopted in highway management practice. We will compare the different approaches on real traffic data on the southern highway ring of Prague.

Verifikovaná numerika pomocí systému INTLAB

P. Příkryl

Verifikovaná numerika (anglicky validated numerics) se zaměřuje výhradně na korektní matematické úlohy a odvozuje pro ně rigorózní matematická tvrzení ve formě postačujících podmínek, které se dají opět rigorózně ověřovat na počítači použitím aritmetiky v pohyblivé řádové čárce. Můžeme tak například ověřit, zda daná matice je regulární, nebo získat hodnotu kořene nelineární rovnice se zaručeným a realistickým odhadem přesnosti. O použité strojové aritmetice se předpokládá pouze, že splňuje dnes standardně implementovanou normu IEEE 754. Systém INTLAB je nadstavbou (toolboxem) počítačového systému MATLAB a jakkoli není pro práci s verifikovanou numerikou nutný (což ukážeme), výrazně ji zjednodušuje. V prezentaci ukážeme některé jednodušší příklady práce s verifikovanou numerikou, k dispozici bude rovněž základní literatura (v elektronické formě, pdf). Předpokládáme, že bude k dispozici rovněž konkrétní instalace systému INTLAB, kterou si případní zájemci budou moci vyzkoušet.

Matematické modelování procesů probíhajících v betonu při požáru

P. Rozehnalová

Príspevek se zabývá matematickým modelem popisujícím procesy probíhající v betonu při požáru. Tento děj je popsán nelineární soustavou parciálních diferenciálních rovnic, na základě které je odvozeno numerické schéma. Numerické výsledky získané metodou konečných prvků jsou srovnány s experimentem.

Numerical analysis of patterns in reaction-diffusion systems

V. Rybář

Reaction-diffusion systems are used in biology to explain phenomena such as symmetry breaking, spatial variations, and formation of patterns. Since they are non-linear partial differential equations, their analysis is, beyond linearisation, highly difficult. This contribution offers results of numerical analysis of one particular reaction-diffusion system modelling formation of pigment patterns on the coat of a leopard.

Smooth approximation spaces based on a periodic system

K. Segeth

A way of data approximation called the smooth approximation was introduced by Talmi and Gilat in 1977. In the contribution, we are concerned with mathematical as well as computational aspects of this smooth approximation of data. Such an approach to approximation employs a (possibly infinite) linear combination of smooth basis functions with coefficients obtained as the unique solution of a variational problem. While the problem guarantees the smoothness of the approximant and its derivatives, the constraints represent the interpolating or smoothing conditions at nodes. The smooth approximation is studied while a special attention is paid to the periodic basis system $\exp(ikx)$. Some 1D numerical examples are presented.

Numerical simulation of free-surface flows with surface tension

P. Sváček

In this paper, the numerical approximation of the flow of two immiscible incompressible fluids is considered with the surface tension effects included. The problem formulation shall be given, reformulated in a suitable form for finite element discretization. The two phase flow is treated with the aid of the level set method. The details of numerical approximations are discussed and numerical results shown.

Acceleration of Le Bail fitting method on massively parallel platforms

I. Šimeček

This paper deals with some methods used in the crystal structure determination using powder diffraction. We aim at design of an effective algorithm that will utilize a GPGPU platform for indexing powder patterns based on the Le Bail fitting method. We evaluate scalability of the algorithm and compare its performance with existing solutions.

Parallelization of opt-aiNet algorithm focusing on modern GPU

I. Šimeček

This paper presents a study of parallelization of opt-aiNet algorithm which comes from Artificial Immune Systems (AIS), one part of large family of population based algorithms inspired by nature. Opt-aiNet algorithm is based on an immune network theory which incorporates knowledge about mammalian immune systems in order to create a state-of-art algorithm suitable for multimodal function optimization problems. The algorithm is known for combination of local and global search with an emphasis on maintaining stable set of distinct local optima solutions and its other modifications can be used for many other purposes like data clustering or combinatorial optimization.

Wavelet Galerkin method in higher dimensions

V. Finěk, M. Šimůnková

The numerical solution of PDEs is usually limited to problems with up to three or four dimensions, due to the so-called curse of dimensionality. We implemented recently Wavelet Galerkin Method to solve the Poisson equation in higher dimensions. Our implementation originally used wavelets based on quadratic splines which have short supports and small condition number but their duals are globally supported. In our contribution, we present numerical results for further types of wavelets including multiwavelets.

Vortex identification by average corotation of line segments near a point

J. Šístek

A new quantity measuring the average corotation of material line segments near a point has been recently introduced. At a given point, the vector of average corotation is defined using two ingredients: (i) analysis of the velocity gradient in an arbitrary plane going through the examined point, and (ii) averaging the effect over all planes. Within each plane, the flow is analysed by means of the triple decomposition method (TDM) distinguishing contributions due to rigid-body rotation, shear and strain. The averaging is achieved through integration over a unit sphere, which is performed by dedicated schemes for numerical integration in practical computations.

If scaled properly, the resulting vector of average corotation can be seen as the part of vorticity corresponding to rigid body rotation, with contribution of shear explicitly eliminated. Being derived from kinematic considerations, the method can determine the 'plane of swirling', and it is also applicable to compressible and variable-density flows.

The magnitude of the vector of average corotation is employed for identification of vortices in three-dimensional fluid flows. It is shown that the new method well reproduces results of some widely used methods (λ_2 and Q) in regions of low external shear. However, the popular methods, unlike the proposed one, fail to correctly interpret the high shear zones of bluff-body wakes behind sharp edges, which are interpreted in a biased manner as vortices.

Solution of mechanical problems in fractured rock with user-defined interface of Comsol Multiphysics

I. Škarydová

We would like to introduce the main idea and some scoping calculations for the solution of mechanical problems in fractured rock using Comsol Multiphysics (specifically Comsol Java API interface due to some advanced functions). This commercial computational system is based on FEM and fractures in mechanical problems are still not implemented in it.

We consider 2D problems with a fracture which is defined independently of the finite-element discretization where fracture properties will be included through the constitutive laws. The actual implementation should be based on the principles of extended finite element method (a way of fracture description, enrichment functions for rock elements containing fracture, etc). The implementation has not fully completed yet but it should bring better description of the mechanical behavior for fractured rock in this tool.

Adaptive higher-order finite element methods for transient PDE problems based on embedded higher-order implicit Runge–Kutta methods

P. Šolín

We present a new class of adaptivity algorithms for time-dependent partial differential equations (PDE) that combine adaptive higher-order finite elements (hp -FEM) in space with arbitrary (embedded, higher-order, implicit) Runge–Kutta methods in time. Weak formulation is only created for the stationary residual, and the Runge–Kutta methods are specified via their Butcher's tables. Around 30 Butcher's tables for various Runge–Kutta methods with numerically verified orders of local and global truncation errors are provided. A time-dependent benchmark problem with known exact solution that contains a sharp moving front is introduced, and it is used to compare the quality of several embedded implicit higher-order Runge–Kutta methods. Numerical experiments also include a comparison of adaptive low-order FEM and hp -FEM with dynamically changing meshes. All numerical results presented in this study were obtained using the open source library Hermes (<http://hpfem.org/hermes>).

NCLab – free cloud computing platform for education and research

P. Šolín

NCLab is a public cloud computing platform that operates in 7 languages and serves students and instructors in more than 100 countries. It hosts a large variety of modules based mostly on open source software such as LaTeX, Python, GNU Octave, SciLab, R, and CUDA. NCLab also provides engaging self-paced courses in computer programming, 3D modeling (CAD design), and other STEM subjects for K-12 schools and homeschoolers. We will give a brief overview of the platform and mention some aspects which might be of interest to Czech users.

Metody s vysokým rozlišením pro řešení úloh se zákony zachování

J. Šourek

V příspěvku se zabýváme metodou konečných objemů pro řešení parciálních diferenciálních rovnic hyperbolického typu vyskytujících se v úlohách se zákony zachování. Byly implementovány a testovány různé metody s vysokým rozlišením pro řešení nelineárních soustav těchto rovnic v jedné prostorové dimenzi a tyto přístupy budou využity pro řešení úloh ve více prostorových dimenzích na nestrukturované síti. Dále budeme hledat souvislosti mezi těmito metodami a jinými schémata, jako jsou Residual Distribution Schemes (RDS) a Discontinuous Galerkin Method (DGFEM).

Výpočtové přístupy k inverzním problémům z inženýrské praxe

J. Vala

Vývoj nových inženýrských konstrukcí a technologií pracuje často s pokročilými materiály složitých struktur, jejichž vlastnosti nelze na rozdíl od tradičních materiálů odhadovat ze zkušenosti. Kvalita výpočtového modelování příslušných fyzikálních procesů, založeného většinou na principech klasické termomechaniky, je podmíněna věrohodností konstitutivních vztahů, zpravidla již nelineárních, pocházejících ze zjednodušených experimentů. Přednáška ukáže současný stav výpočtové identifikace takových vztahů ve vybraných inženýrských aplikacích, zejména pro přenos tepla a hmoty, včetně původních experimentálních i numerických výsledků FAST VUT v Brně.

Challenges for numerical methods in biochemistry: Can we solve 20-dimensional PDE?

T. Vejchodský

There are many challenges for mathematical modelling of chemical processes in living organisms. We face very high complexity of these systems, lack of experimental data, considerable stochastic effects due to low copy numbers of certain biomolecules, complicated spatial organization of a cell, and active transport of chemicals caused by cellular membranes and microtubules. Complexity of these systems is enormous and we are still far from their understanding. However, the progress in biochemistry is fast and the amount of data and knowledge dramatically grows. This provides many opportunities for using mathematical tools. There is great potential for mathematics to help and to improve the understanding of these complex biological systems.

In this talk we will assume significant simplifications. As a model we will consider the well-mixed system of chemical reactions and we will describe it by both deterministic and stochastic approach. We will overview the standard deterministic ODE-based mass-action approach and we will stress its limitations in the context of biochemical systems. We will explain the need for stochastic models and we will provide the basic ideas of stochastic modelling. We will present and compare several stochastic simulation algorithms. Further, we will show how to compute the stationary probability density function by solving chemical master equation (CME) and by chemical Fokker-Planck equation (CFPE). The CME is in fact an infinite system of ODEs and the CFPE is a linear second-order evolutionary PDE with variable coefficients. We will comment on numerical methods for these equations. However, since every chemical species corresponds to a dimension, we face the problem of solving high-dimensional PDE, which is known as the curse of dimensionality. We will conclude the talk by explaining the main idea of tensor methods to break this curse.

On Runge–Kutta, collocation and discontinuous Galerkin methods: Mutual connections and resulting consequences to the analysis

M. Vlasák, F. Roskovec

Discontinuous Galerkin methods (DGM) start to be very popular solver for stiff ODEs. To be able to prove some more subtle properties of DGM we will show that DGM is equivalent to a specific Collocation method which is in turn equivalent to an even more specific implicit Runge–Kutta method. These equivalences provide us with another interesting view on DGM and enable us to employ well known techniques developed already for any of these methods. Our aim will be proving superconvergence property of DGM in Radau quadrature nodes.

Modifikovaná metoda BNS s omezenou pamětí, odvozená z myšlenky sdružených směrů

J. Vlček, L. Lukšan

Je navržena modifikace metody BNS s omezenou pamětí pro nepodmíněnou minimalizaci, spočívající ve vektorových korekcích, využívajících hodnot z předchozích iterací a založených na myšlence sdružených směrů. Oproti podobné metodě, o níž jsem referoval minule, lze použít korekční vektory z více předchozích iterací. Pro kvadratické účelové funkce je zlepšení konvergence v jistém smyslu nejlepší možné, všechny uložené korigované rozdílové vektory jsou vzájemně sdružené a kvazinevtonovské podmínky s těmito vektory jsou splněny. Nový algoritmus je globálně konvergentní pro konvexní dostatečně hladké funkce a numerické výsledky demonstrují jeho efektivitu.

Comparison of algorithms for calculation of the greatest common divisor of several polynomials

J. Zítko, J. Eckstein

The computation of the greatest common divisor (GCD) has many applications. In this paper, Sylvester and Bezout matrices are considered for this purpose. The computation is divided into three stages. A rank revealing method is shortly mentioned in the first one and then the algorithms for calculation of an approximation of GCD are formulated. In the final stage the coefficients are improved using Gauss-Newton method. Numerical results show the efficiency of proposed last two stages.

Solution of algebraic systems arising from the discontinuous Galerkin discretization of PDEs by the p -multigrid technique

A. Živčák

During last ten years, the discontinuous Galerkin (DG) method became very popular technique for the numerical solution of partial differential equations. It is based on piecewise polynomial but discontinuous approximation, which allows us to simply construct hierarchical basis functions locally for each element. The DG discretization leads to the necessity to solve large (non-)linear algebraic systems. The so-called *multigrid methods* belong among the most efficient techniques for the numerical solution of algebraic systems. For the DG discretization we develop the so-called p -multigrid, where a hierarchy of discretization spaces with respect to polynomial approximation degree p is considered. Due to the locality of basis function we construct the operators of the restriction and prolongation locally.

Numerical solution of a new hydrodynamic model of flocking

A. Živčáková, V. Kučera

This work is concerned with the numerical solution of equations describing the dynamics of flocks of birds or other individual entities forming herds or swarms. We will consider the model of Fornasier et al. (2010), which is a hydrodynamic limit of the well known Cucker-Smale model. The resulting equations consist of the Euler equations for compressible flow with an additional nonlocal nonlinear source term. Due to the computational complexity of the model, we focus only on the one-dimensional case. For the numerical solution we use a suitably modified semi-implicit discontinuous Galerkin method. This work represents the first thorough attempt to solve these equations numerically.